بسم الله الرحمن الرحيم

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه شهید مدنی آذربایجان
دانشکده‌ی علوم پایه
گروه شیمی

پایان‌نامه مقطع کارشناسی ارشد
رشته‌ی شیمی گرایش شیمی فیزیک

سنتز چارچوبهای فلزی-آلی

استاد راهنما

دکتر سید مسعود سید احمدیان

استاد مشاور

دکتر ذولفقار رضوانی

پژوهشگر

سارا محمدزاده

بهمن ۹۲
تبریز/ایران

تقدیم به مهربان فرشتگانی که:

لحظات ناب باور بودن، لذت و غرور دانستن، جسارت خواستن، عظمت رسیدن و تمام تجربه های یکتا و زیبای زندگیم، مدیون حضور سبز آنهاست، پدر و مادر عزیزم.

سپاس بی کران خدای مهربان را که بزرگترین امید و یاور در لحظه لحظه زندگیست.
با شکر و سپاس فراوان از:

- استاد راهنمای ارجمندم، جناب آقای دکتر سید احمدیان که دلسوزانه و مهربانانه راهنمای من بودند و در این عرصه از هیچ مساعدتی بر من دریغ نکردند.
- جناب آقای دکتر رضوانی که مشاوره این پایان نامه را بر عهده داشته اند و از محضر علمی ایشان در طول تحصیل بهره مند شده ام.
- جناب آقای دکتر سلطانی که زحمت مطالعه و داوری پایان نامه را تقبل فرموده اند.
- جناب آقای دکتر حبیبی مدیر گروه محترم گروه شیمی که مقدمات دفاع از پایان نامه را فراهم نمودند.
- از تمام دوستان عزیزم در آزمایشگاههای تحقیقاتی تجزیه، آلی، معدنی، شیمی فیزیک و از دوستان و هم کلاسی های قدیمیم که همواره در تمام مراحل زندگی در کنارم بودند سپاسگذارم.

از خدای مهربانم سپاسگزارم که به من فرصتی داد که این پروژه را به اتمام برسانم.

با تقدیر و تشکر از:

استاد راهنمای بزرگوارم، **"آقای دکتر سید احمدیان"**، که زحمت سرپرستی این پایان نامه را بر عهده داشتند و همواره من از راهنمایی ها و نصیحتهای ارزشمندو دلسوزانه ایشون بهره مند بودم.

استاد مشاورارجمندم، آقای **"دکتر رضوانی"**، که مشاوره‌ی این پایان‌نامه را برعهده داشتند.

از آقای دکتر سلطانی که زحمت قبول داوری این پایان نامه را برعهده گرفتندتشکر کنم

از جناب اقای دکتر حبیبی مدیر گروه محترم بخاطر مساعدت های بی دریغشان سپاسگزاری می کنم .

از آقای شمالی بخاطر همکاری دوستانه ای که بخصوص برای استفاده از دستگاه ماکرویو داشتند سپاسگزارم . از آقای قاسم نزاد و خانم جوان بخاطر زحمتهایی که برای ویرایش پایان نامه بهشون دادم بسیار سپاسگزارم.

از تمام دوستان عزیزم در ازمایشگاههای تحقیقاتی تجزیه آلی معدنی بوبژه دوست و همکار عزیزم در آزمایشگاه شیمی فیزیک خانم صائمی متشکرم .از دوستان و هم کلاسی های قدیمیم که همیشه با صفا و مهربونیشون در تمام مراحل زندگیم بهم دلگرمی دادن خانمها اسماعیلی..رضایی..محمودی...عظیمی...و آقای دوستکام که زحمت کشیدند و از تبریز تشریف آوردن بسیار سپاسگزارم.

چکیده:

چارچوب های فلزی-آلی(MOF) ها گروهی از مواد هیبریدی آلی- معدنی میباشند که از خوشه های فلزی ساخته شده اند که این خوشه ها توسط یک اتصال دهنده آلی به یکدیگر متصل شده اند. این مواد به دلیل داشتن سطح وسیع و حجم منافذ بالا توجهات فراوانی را به خود جلب کرده اند.

CO_2 یکی از گازهای گلخانه ای می‌باشد که باعث گرم تر شدن کره زمین شده است. بدین منظور توسعه فن آوری هایی برای زدایش و جداسازی مقادیر زیاد CO_2 ضروری است. MOF ها بدلیل داشتن تنوع در ترکیب ساختار و انعطاف پذیری در سطح مولکول و رفتار جذب و واجذب برگشت پذیر، گزینه های مناسبی برای جذب CO_2 در نظر گرفته می‌شوند. صدها مقاله درباره انواع جدید MOF ها وجود دارد که در میان آنها IRMOF-1 با پتانسیل صنعتی امیدوار کننده بیشتر از MOF های دیگر مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است.IRMOF-1 از نیترات روی شش آبه به عنوان خوشه فلزی تشکیل شده است که توسط ۱و ٤ بنزن دی کربوکسیلات به یکدیگر اتصال پیدا کرده‌اند.

در این پژوهش چارچوب فلزی – آلی IRMOF-1 و چارچوب فلزی – آلی مس ، با موفقیت با استفاده از دو روش هیدروترمال و و روش سریعتر و کارآمدتر و سبزتر میکروویو با موفقیت سنتز شد و محصولات واکنش توسط پراش اشعه ایکس (XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) شناسایی گردید.

کلمات کلیدی: ترکیبات فلزی-آلی، سنتز، چارچوب

فهرست مطالب

فصل اوّل : مقدمه و بررسی منابع

۱-۱- مقدمه ۱

۱-۲- مواد متخلخل ۱

۱-۳- تاریخچه ۲

۱-٤- چارچوبهای فلزی-آلی (MOF ها) ۳

۱-٤-۱- واحدهای ساختاری اولیه **۵**

۱-٤-۱-۱- یونهای فلزی **۵**

۱-٤-۱-۲- لیگندهای آلی ٦

۱-٤-۲- واحدهای ساختاری ثانویه (SBU) ۸

۱-۵- ویژگی چارچوب های فلزی- آلی ۹

۱-۵-۱- قابلیت طراحی بالا ۹

۱-۵-۲- نظم و قاعده ۹

۱-۵-۳- انعطاف پذیری و پویایی ۹

۱-٦- MOF های با تخلخل بالا ۱٤

۱-۷-روشهای سنتز MOF ها ۱۷

۱-۷-۱-روش هیدروترمال ۱۷

۱-۷-۲- روش امواج ریز موج (MW) ۱۸

۱-۷-۳-روش میکرو امولسیون (میکرو تعلیق) و میکرو امولسیون فاز معکوس ۱۸

۱-۷-٤-روش اولتراسونیک ۱۹

۱-۷-۱-۱-سنتز هیدروترمال ۱۹

۱-۷-۱-۱-۱-متغیرها ۱۹

۱-۷-۱-۱-۲-فرایند اصلی روش هیدروترمال ۲۱

۱-۷-۱-۱-۳- مزایای روش هیدروترمال ۲۲

۱-۷-۲-۱- مایکروویو در شیمی ۲۲

۱-۷-۲-۲- گرمای مایکروویو ۲۳

۱-۷-۲-۱-تابش امواج مایکروویو بر روی مواد دی-الکتریک ۲۳

۱-۷-۲-۲-۲-تابش امواج مایکروویو بر روی موادرسانا ۲٤
۱-۷-۲-۳- اثر مایکروویو ۲۵
۱-۸-کاربردها ۲۵
۱-۸-۱- استفاده از MOFها برای ذخیره گازها ۲۵
۱-۸-۲- جذب انتخابی گاز در MOF ها ۲۷
۱-۸-۳- MOF ها به عنوان کاتالیست ۲۸
۱-۸-٤- کاربردهای مغناطیسی MOF ها ۲۹
۱-۸-۵- MOF ها به عنون مواد الگو ۲۹
۱-۸-٦- MOF ها برای کاربردهای بیولوژیکی ۳۰
۱-۸-٦-۱- MOF ها برای تحویل دارو ۳۱
۱-۸-٦-۲- MOF های تحویلی گاز NO ۳۱
۱-۹- کاربردهای دیگر ۳۲

فصل دوم: مواد و روش ها

۲-۱- معرفی دستگاهها و تجهیزات مورد استفاده ۳٦
۲-۱-۱ طیف سنج اشعه ایکس(XRD) ۳٦
۲-۱-۲- میکروسکوپ الکترونی روبشی(SEM ۳۷
۲-۱-۳- آون ۳۷
۲-۱-٤- کوره ۳۷
۲-۱-۵- رآکتور اتوکلاو ۳۷
۲-۱-٦- ترازوی دیجیتالی ۳۷
۲-۱-۷- دستگاه سانتریفیوژ ۳۷
۲-۲-مواد شیمیایی مصرفی ۳۸
۲-۳-روش تهیه چارچوبهای فلزی-آلی روی(IRMOF-1) به روش هیدروترمال و تابش مایکروویو ۳۸
۲-۳-۱-روش تهیه نمونه۱ ..... ٤۰
۲-۳-۲-روش تهیه نمونه ۲ ..... ٤۱
۲-۳-۳-روش تهیه نمونه های ۳و ٤و ۵ ..... ٤۱
۲-۳-٤-روش تهیه نمونه ٦ ..... ٤۱

۲-۳-۵-روش تهیه نمونه۷ ..... ٤١
۲-۳-٦-روش تهیه نمونه ۸ ..... ٤٢
۲-۳-۷-روش تهیه نمونه ۹ ..... ٤٢
۲-۳-۸- روش تهیه نمونه ۱۰ ..... ٤٢
۲-۳-۹-روش تهیه نمونه ۱۱ ..... ٤٢
۲-۳-۱۰-روش تهیه نمونه ۱۲ ..... ٤٣
۲-۳-۱۱-روش تهیه نمونه۱۳ و ١٤ ..... ٤٣
۲-۳-۱۲-روش تهیه نمونه ۱۵ ..... ٤٣
۲-٤-بررسی اثر دمای واکنش در روند سنتز IRMOF-1 ..... ٤٣
۲-۵-بررسی اثر زمان واکنش ٤٣
۲-٦-روش تهیه چارچوبهای فلزی- آلی مس ٤٤
۲-٦-۱-روش تهیه نمونه ١٦ ..... ٤٤
۲-٦-۲- روش تهیه نمونه ۱۷ ..... ٤٥
۲-٦-۳-روش تهیه نمونه ۱۸ ..... ٤٥
۲-٦-٤-روش تهیه نمونه ۱۹ ..... ٤٥

فصل سوم: نتایج و بحث

۳-۱- بررسی الگوی پراش اشعه X ٤٨
۳-۲- بخش اول :سنتز ٤٩
۳-۲-۱- بررسی الگوهای پراش IRMOF-1 با روش هیدروترمال ٤٩
۳-۲-۲- بررسی الگوهای پراش IRMOF-1 با روش مایکروویو ٥٦
۳-۳- بخش دوم:سنتز چارچوبهای فلزی-آلی مس ٦٥
۳-۳-۱-بررسی الگوهای پراش چارچوبهای فلزی آلی مس با روش مایکروویو ٦٥
۳-٤- بررسی مورفولوژی MOFهای سنتزی ٦٨
نتیجه‌گیری ۷۲
پیشنهادات ۷۳
منابع و مآخذ ۷٤

فهرست جداول

جدول ۱-۱داده‌های تخلخلی چارچوبهای فلزی-آلی با تخلخل بالا ۱۷

جدول۱-۲ روشهای ذخیره سازی ۲۶

جدول ۱-۳ جذب پر فشار CO_2 یرای MOF های انتخابی ۲۸

جدول ۲-۱- مواد شیمیایی مصرفی ۳۸

جدول ۲-۲-شرایط نمونه های سنتز شده با روش هیدروترمال..... ۳۹

جدول ۲-۳-شرایط نمونه های سنتز شده چارچوب های فلزی- آلی مس ٤٤

فهرست اشکال و نمودارها

نمودار ۱-۱ سیر سنتز MOF ها در طول دهه گذشته ۳

شکل ۱-۱ شمایی از چارچوبهای فلزی-آلی ٤

شکل ۱-۲ مثالهایی از اشکال هندسی چارچوبهای فلزی-آلی ٦

شکل ۱-۳ نمونه هایی از لیگندهای بکار رفته در سنتز MOF ها ۷

شکل ۱-٤ نمونه‌هایی از اشکال هندسی SBU ها ۸

شکل ۱-۵ واحدهای ساختاری ثانویه معدنی که معمولا در ساختار کربوکسیلات وجود دارند ۱۱

شکل ۱-٦ صفحات دایمری گلوتارات مس با ستونهای ٤و ٤ بای پیریدین ۱۳

شکل ۱-۷ ساختارهای چارچوبهای فلزی-آلی با تخلخل بالا ۱٦

شکل ۱-۸ شکل اتوکلاو ۲۰

شکل ۱-۹ راکتور هیدروترمال ۲۱

شکل ۱-۱۰ اشکال جالبی که با روش هیدروترمال به دست آمده‌اند ۲۲

شکل ۱-۱۱ تاثیر امواج مایکروویو بر روی مواد دی الکتریک ۲٤

شکل ۱-۱۲ تاثیر امواج مایکروویو بر روی مواد رسانا ۲٤

شکل ۱-۱۳ چرخه فعالسازی –بارگذاری / ذخیره و تحویل دارو برروی (CO,NI ۳۲

شکل ۱-۱٤ MOF های لومینسانسی ۳۳

نمودار ۱-۲ بازده جذب CO_2 در MOF..های مختلف ۳٤

شکل ۳-۱- الگوی پراش IRMOF-1 خالص ٤۱

شکل ۳-۲-الگوی پراش IRMOF-1 در دمای ۹۰ درجه سانتیگراد طی زمان الف) ۱۸ ، ب) ۲۰ و
ج) ۲۲ ساعت به روش هیدروترمال ۵۰

شکل ۳-۳-الگوی پراش IRMOF-1 در دمای ۱۰۰ درجه سانتیگراد و در طی زمان‌های الف) ۱۸ و
ب) ۲۰ ساعت ۵۱

شکل ۳-٤-الگوی پراش IRMOF-1 در دمای ۱۰۵ درجه سانتیگراد و در طی زمان‌های الف)۱۸ و
ب) ۲۰ ساعت ۵۲

شکل ۳-۵-الگوی پراش IRMOF-1 در زمان ۲۰ ساعت و در دماهای دمای ۹۰،۱۰۰ و
۱۰۵ درجه سانتیگراد ۵۳

شکل ۳-٦- الگوی پراش IRMOF-1 در دمای ۱۰۰ درجه سانتیگراد طی زمان ۲۰ ساعت
با مقدار دو برابر لیگند ۵٤

شکل ۳-۷-الگوی پراش IRMOF-1 در دمای ۱۰۸ درجه سانتیگراد طی زمان ٤ روز ٥٥
شکل ۳-۸-الگوی پراش IRMOF-1 در دمای ۱۳۰ درجه سانتیگراد طی زمان های الف) ٦۰ و
ب) ۳۰ دقیقه ٥٧
شکل ۳-۹-الگوی پراش IRMOF-1 در دمای ۱۳۰ درجه سانتیگراد طی زمان الف) ٢٦ و ب) ۲۰ دقیقه
در MW-UTS ٥٨
شکل ۳-۱۰- الگوی پراش IRMOF-1 با شیب دمایی در MW ٥٩
شکل ۳-۱۱-الگوی پراش IRMOF-1 در دمای الف) ۱۳۰ ، ب) ۱٤۰ و ج) ۱٦۰ درجه سانتیگراد طی
زمان ٦۰ دقیقه در MW ٦۰
شکل ۳-۱۲-الگوی پراش IRMOF-1 در دمای ۱٦۰ درجه سانتیگراد طی زمان ٦۰ دقیقه با دو برابر
مقادیر قبلی در MW ٦۱
شکل ۳-۱۳-الگوی پراش IRMOF-1 در دمای ۹۰ درجه سانتیگراد طی زمان ۱۸ ساعت در کوره
الف) قبل و ب) بعد از زدایش توسط کلروفرم ٦۲
شکل ۳-۱٤-الگوی پراش IRMOF-1 در دمای ۹۰ درجه سانتیگراد طی زمان ۲۰ ساعت در کوره
الف) قبل و ب) بعد از زدایش توسط کلروفرم ٦۳
شکل ۳-۱٥-الگوی پراش IRMOF-1 در دمای ۱٤۰ درجه سانتیگراد طی زمان ۱ ساعت در MW
الف) قبل و ب) بعد از زدایش توسط کلروفرم ٦٤
شکل۳-۱٦-الگوی پراش مربوط به نانو پودرهای مس در دستگاه مایکروویو و در دمای ۱٤۰ درجه سانتیگراد
به مدت ٦۰ دقیقه با نسبت های ۳ به ٤ از حلال اتانول- آب با نیترات مس ٦٥
شکل۳-۱۷-الگوی پراش مربوط به نانو پودرهای مس در دستگاه مایکروویو و در دمای ۱٤۰ درجه سانتیگراد
به مدت ٦۰ دقیقه با نسبت های ٦ به ۸ از حلال اتانول- آب با نیترات مس ٦٦
شکل۳-۱۸-الگوی پراش مربوط به نانو پودرهای مس در دستگاه مایکروویو و در دمای ۱٤۰ درجه سانتیگراد
به مدت ٦۰دقیقه با نسبت های ۸ به ٦ از حلال اتانول- آب با سولفات مس ٦۷
شکل۳-۱۹-تصویر SEM مربوط به IRMOF-1 در شرایط سنتزی هیدروترمال ٦۸
شکل۳-۲۰-تصویر SEM مربوط به IRMOF-1 در شرایط سنتزی هیدروترمال ٦۹
شکل۳-۲۱-تصویر SEM مربوط به IRMOF-1 در شرایط سنتزی مایکروویو ۷۰
شکل۳-۲۲-تصویر SEM مربوط به IRMOF-1 در شرایط سنتزی هیدروترمال ۷۱
شکل۳-۲۳-تصویر SEM مربوط به چارچوب فلزی-آلی مس در شرایط سنتزی مایکروویو ۷۲
شکل۳-۲٤-تصویر SEM مربوط به چارچوب فلزی-آلی مس در شرایط سنتزی مایکروویو ۷۲

فصل اول

مقدمه

۱-۱- مقدمه

چارچوب های فلزی-آلی(MOF) مواد کریستالی متخلخلی هستند که شامل بخشهای آلی به عنوان اتصال دهنده و اکسیدهای فلزی(واحدهای ساختاری ثانویه) با سطح ویژه بیشتر از$۱۰۰۰ m^2/g$ می‌باشند. این مواد در سالهای اخیر توجهات فراوانی را به خود جلب کرده است. در اینجا بحث را با مواد متخلخل آغاز و سپس به تاریخچه و کاربردهای چارچوبهای فلزی-آلی می رسیم.

۱-۲-مواد متخلخل

مواد متخلخل بسیار مفید وحائز اهمیت بوده و در ذخیره سازی و جداسازی گازها که بر اساس جذب سطحی صورت می‌گیرد، کاتالیز انتخابی که بر اساس اندازه و شکل صورت می‌گیرد و نیز در ذخیره‌سازی داروئی و رهایش آن‌ها و همچنین به عنوان الگوهایی که در آماده‌سازی موادی که دارای ابعاد کمتری هستند بکار می‌روند[۱-٦].

مواد متخلخل مواد آلی و یا غیر آلی (معدنی) اند. بی شک رایج ترین ماده متخلخل آلی، کربن فعال است که از پیرولیز مواد غنی از کربن تهیه می‌شود. این مواد مساحت بالا و نیز قابلیت جذب زیادی داشته اما فاقد ساختار منظم هستند. این مواد با وجود نداشتن آرایش منظم، مواد متخلخل کرنبی کاربردهای زیادی دارند که شامل جداسازی و ذخیره گازها، خالص سازی (تخلیص) آب و زدایش و بازیافت حلال می‌باشد[۷].

چارچوبهای متخلخل غیرآلی (معدنی)دارای ساختارهای با آرایش منظم اند (نظیر زئولیتها). سنتز آنها اغلب نیازمند الگوهای آلی یا معدنی می‌باشد که با اندر کنش های قوی مابین چارچوب معدنی و الگوی مورد نظر در حین سنتز همراه می‌شود[۳].

چارچوب های معدنی در جداسازی و کاتالیزوری بسیار حائز اهمیت بوده و مورد استفاده قرار گرفته‌اند. برای بهره‌مندی از خواص مواد متخلخل آلی و معدنی هیبریدهای متخلخل که تحت عنوان چارچوبهای فلزی- آلی[1] شناخته می‌شوند (MOFs) تهیه و تولید شده‌اند که هم بسیار پایدار بوده و هم دارای آرایش منظمی هستند و سطح وسیعی نیز دارند.MOF ها با نامهای مختلفی شناخته می‌شوند. شبکه های کئوردینانسی (هماهنگ) متخلخل، پلی‌مرهای کئوردینانسی متخلخل و غیره. تفاوت در نوع نامگذاری آن‌ها بازتاب نوع چارچوب و محققق سازنده آن‌هاست[۸-۱۰].

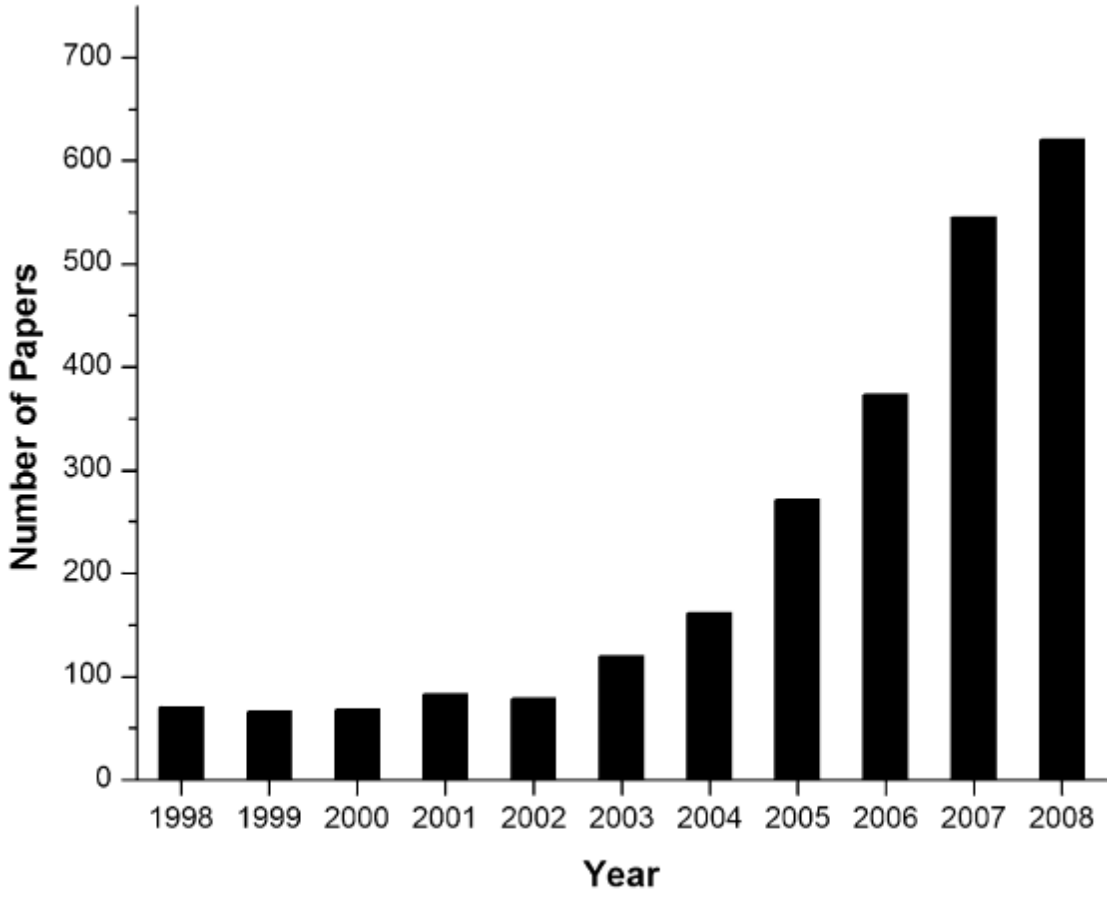
۱-۳- تاریخچه

اصطلاح «چارچوبهای فلزی-آلی» (MOF) اولین بار توسط یاغی[2]در سال ۱۹۹۵به کار رفت. او یک کمپلکس مس ٤ و ٤ بای پیریدیل سنتز کرده بود که دارای اندر کنشهای فلزی-آلی زیادی بود، MOF ها به خانواده پلی مرهای کئودیناسیونی تعلق دارند. اصطلاح «پلی مر کئوردیناسیونی» در سال ۱۹٦۰ ظاهر شده است که خیلی پیشتر ازظهور اصطلاح MOFها می‌باشد[۱۱].

پلی‌مرهای کئوردیناسیونی ساختارهای بسیاری را شامل می‌شوند که همه آنها مبتنی بر یونهای فلزی هستند که توسط لیگندهای پل به یکدیگر متصل شده‌اند. در مقایسه با پلی مرهای کئوردیناسیونی MOF ها بسیار ویژه و خاص بوده و اصطلاح MOF برای شبکه های کریستالیزه شده دو یا سه بعدی متخلخل به کار می‌رود[۱۲].

ماهیت کریستال بودن و متخلخل بودن مهمترین ویژگی MOF ها می‌باشد. بنابراین کاملاً قابل قبول است که به MOF ها پلی‌مرهای کئوردیناسیونی متخلخل گفته شود. درنمودار ۱-۱ سیر سنتز چارچوبهای فلزی-آلی در طول دهه گذشته را مشاهده می‌کنید [۸-۱۰].

1-Metal Organic Framework
2-Yaghi

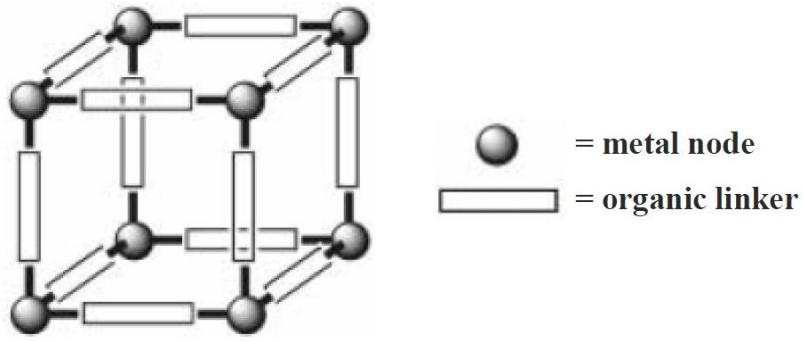


نمودار ۱-۱-سیر سنتز MOF ها در طول دهه گذشته

۱-٤-چارچوبهای فلزی-آلی (MOF) ها

MOF ها دسته جدیدی از مواد هیبریدی هستند که از نقاط[1] فلزی و اتصال دهنده‌های[2] آلی تشکیل می‌شوند که مجموعاً یک ساختار با تخلخل بالا به وجود می‌آورند. همانطور که در شکل ۱-۱ نشان داده شده است، نقاط فلزی در آن به عنوان نقاط اتصال و لیگندهای آلی به عنوان مولکولهای پل به کار رفته اند که مولکولهای پل گرههای فلزی را به صورت هماهنگ به هم‌دیگر وصل کرده و یک شبکه سه بعدی تشکیل می‌دهند.

1 -node
2-Linker



شکل۱-۱- شمایی از چارچوب های فلزی-آلی

MOF ها ترکیباتی بلوری ولی باچگالی پایین هستند. این مواد را می‌توان به طورمعمول در$220^{\circ}C$ محیط، فشارهایی بین صفرتا۲۰ اتمسفر و pH هایی بین ۱-۱۰ سنتز نمود.

حفره هایی که در ترکیبات شبکه وجوددارند، دارای یک اندازه وتوزیع شکل مشخص درمقایسه باسایر ترکیبات متخلخل هستند و بنابراین می‌توانند به دسته‌هایی براساس اندازه حفره تقسیم شوند. ترکیبات ماکرومتخلخل دارای قطر حفره بیشتر از ۵۰ نانومتر، ترکیبات مزومتخلخل دارای قطری بین ۲ تا۵۰ نانومتر وترکیبات میکرومتخلخل قطری کمتر از ۲ نانومتر دارند.

اکثرچارچوبهای فلزی-آلی دارای حفره‌هایی با اندازه نانومتری بوده ودرمحدوده اندازه حفره ای مزومتخلخل ومیکرومتخلخل قرار می‌گیرند.

چگالی کم و مساحت سطح بالای MOF ها برای فناوری ذخیره گازها، جداسازی آنها و تولید ساختمانهایی از مواد با وزن سبک بسیار مفید هستند .ساختارهای نانو متخلخل MOF ها خواص الکترونیکی وکاتالیستی خوبی نشان می‌دهند و ممکن است به عنوان حاملهای بیولوژیکی نیز در علم پزشکی به کار روند.

از ویژگیهای مهم MOF ها، تخلخل بالا (بیشتر از ۹۰٪ کریستال) و سطح ویژه بالای آنهاست (بیشتر از چندین هزار متر مربع)[۱۳-۱۷].

ساختار گسترده و باز MOF ها با حفراتی با قطر ٤٨ Å یک فضای آزاد مضاعفی برای جانشینی[1] مولکولهای مهمان ایجاد می‌کند این امر باعث می‌شود که MOF ها را به عنوان مواد نوید

1 -load

بخش به عنوان مواد مهمان به منظور کاربردهایی نظیر ذخیره‌سازی انرژی (گازهایی نظیر CH_4 و H_2) [۱۸ و ۱۹]، جذب سطحی و جداسازی[۲۰] ، کاتالیزوری[۲۱ و ۲۲] و تحویل دارو[۲۳-۲۷] در نظر بگیریم. بعلاوه ساختار MOF ها کاملاً تنظیم پذیر[1] می‌باشد و با تغییر دادن گروههای فلزی یا لیگند های آلی میتوان ساختارهای متفاوتی از آنها را سنتز کرده و در موارد زیادی به کار برد. همچنین این مواد در جداسازی گازها و غشاهای جدا کننده نیز کاربرد دارند. و به خاطر چنین مزیت هایی است که توجهات فراوانی را در دهه اخیر به خود معطوف کرده‌اند که افزایش مقالات منتشر شده در این زمینه طی سالهای اخیر تاییدی برای این نکته است.

۱-٤-۱-واحدهای ساختاری اولیه

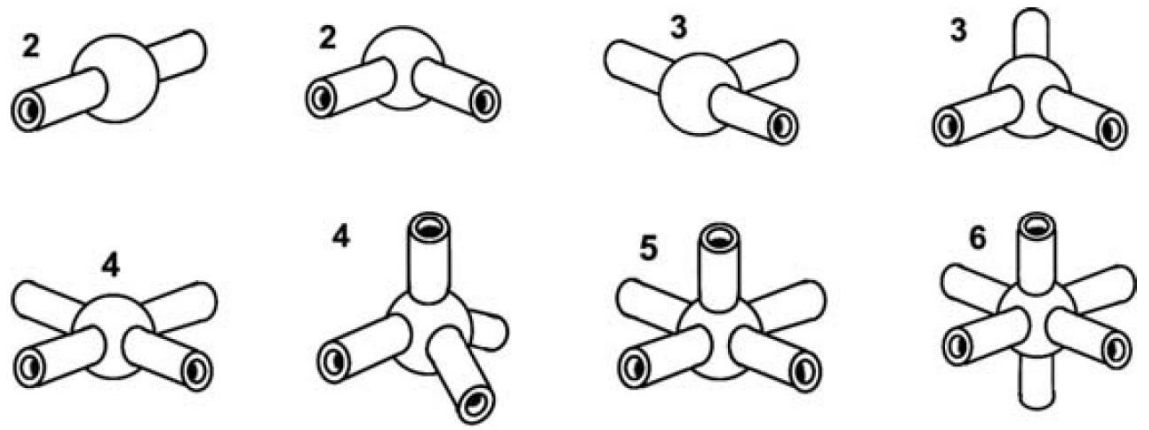
یون های فلزی و لیگندهای آلی بکار رفته در سنتز MOF ها به عنوان واحدهای ساختاری اولیه در نظر گرفته می‌شوند.

۱-٤-۱-۱- یونهای فلزی

یونهای فلزات واسطه به عنوان رابط در ساختار MOF ها بکار می‌روند. که در این میان یونهای فلزات واسطه نظیر Zn^{2+} , cu^{2+} , Fe^{3+} , cr^{3+} بیشتر متداولند[۲۸-۳۰].

بعضی از یونهای فلزات قلیایی[۳۱ و ۳۲] ، فلزات قلیائی خاکی [۳۳-۳۵] و یونهای فلزات خاکهای نادر[۳٦-٤۰] نیز در ساختار MOF ها بکار رفته‌اند.مهمترین ویژگی این رابط ها، تعداد سایتهای پیوندی و جهت گیری آنهاست. بر اساس حالت اکسیداسیونی فلز، عدد کئودیناسیونی آن‌ها می تواند از ۲ تا ۷ تغییر کند، که باعث می‌شود اشکال هندسی مختلفی نظیر خطی، Tشکل یا Yشکل، مسطح مربعی، تتراهدرال ، هرمی، مربعی، اکتا هدرال و ... که نقش بسیار مهمی در ساختار MOF ها دارند تشکیل شوند.

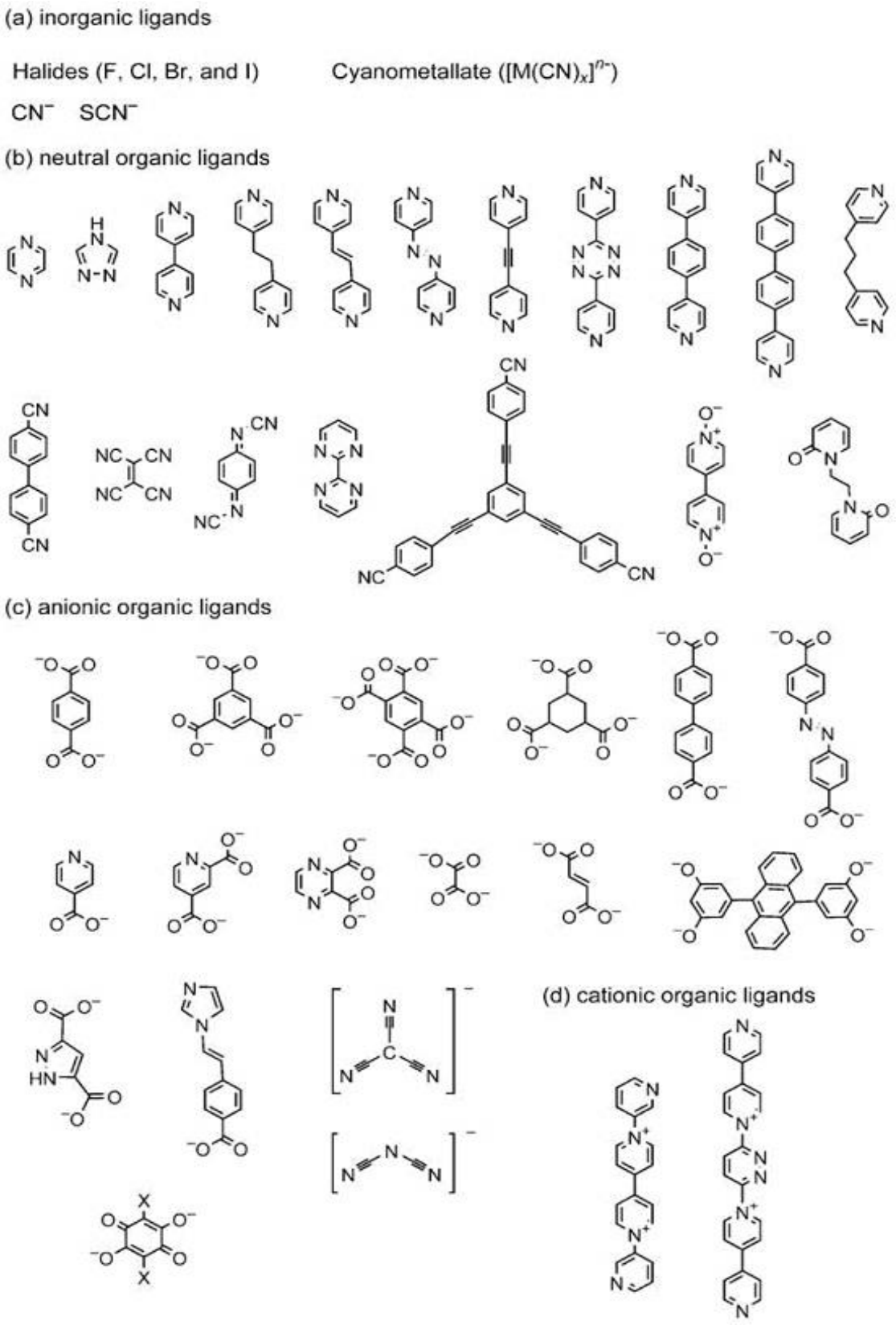
1 -tunable



شکل ۱-۲- مثالهایی از اشکال هندسی چارچوب های فلزی-آلی

۱-٤-۱-۲-لیگندهای آلی

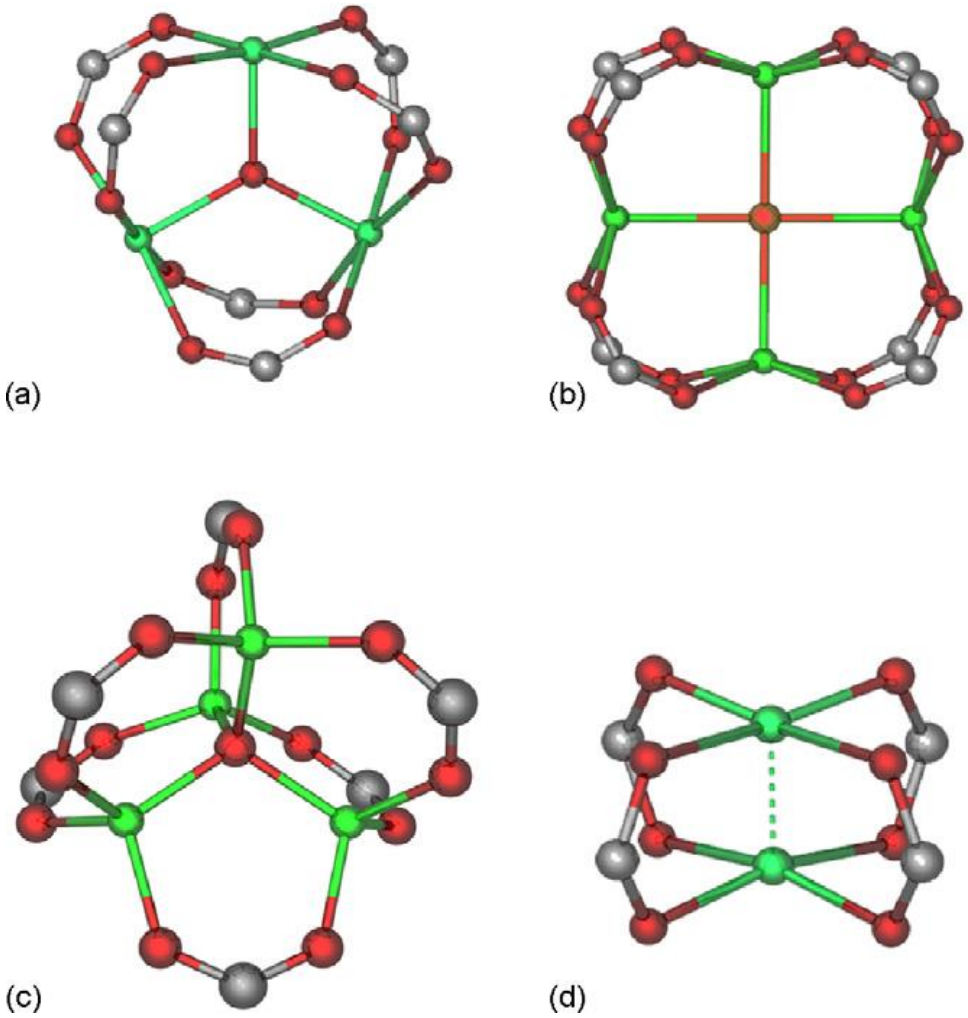
لیگندهای آلی که برای ساخت MOF ها استفاده می‌شوند، به طور عمومی، شامل گروههـای عاملی کئوردیناسیونی نظیر، کربوکسیلات، فسفات، سولفونات، آمین یا نیتریل مـی‌باشـد. شـکل ۱-۳ نمونه‌های از این نوع لیگندها را نشان می‌دهد.



شکل ۱-۳-نمونه هایی از لیگندهای به کار رفته در سنتز MOFها

۱-٤-۲- واحدهای ساختاری ثانویه [1](SBU)»

SBU ها اشکال هندسی خاصی دارند که نقش مهمی در توپولوژی MOF ها دارد. نمونه-های مختلفی از اشکال هندسی SBU ها در شکل ۱-٤ نشان داده شده‌اند. البته اشکال هندسی خیلی بیشتر از آن چیزی است که در اینجا آورده شده‌است. یاغی و همکارانش با جزئیات بیشتر، اشکال هندسی SBU ها را در طراحی چارچوبهای فلزی-آلی شرح داده‌اند. SUB ها، سخت و صلب-اند.MOF های که از SUB ها ساخته شده‌اند، به طور عمومی پایداری ساختاری بالایی نشان میدهند[٤١].



شکل ۱-٤- نمونه‌هایی از اشکال هندسی SBUها a) چهار وجهی مسطح وb) مسطح مربعی و c) تتراهدرال و d) تتراگونال چرخی شکل

1 -Secondary Building Units